信息与电子学科百本精品教材工程

新编计算机类本科规划教材

计算方法

李桂成　编著　　梁吉业　主审

電子工業出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

新编计算机类本科规划教材

计 算 方 法

李桂成 编著
梁吉业 主审

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京 · BEIJING

内 容 简 介

本书比较全面地介绍现代科学与工程计算中常用的数值计算方法。全书共分9章，主要内容有：误差理论、计算方法的数学基础、非线性方程的数值解法、线性方程组的直接解法和迭代解法、函数插值与曲线拟合、数值微分与数值积分、常微分方程数值解法，以及 MATLAB 编程基础及其在计算方法中的应用。

本书知识体系完整，从简要回顾与计算方法有关的数学基础知识，到介绍现代计算软件 MATLAB 在本领域中的应用，书中每一个算法都配有结构化流程图，大部分算法给出了 MATLAB 语言和 C 语言的源代码，书后附有上机实验题目。可从网上免费下载的教学资源包括：电子教案、各章习题详解和模拟试题。

本书可作为高等院校理工科计算机、电子信息类及近电类本科教材使用，也可供从事科学与工程计算的科技工作者和研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/李桂成编著．—北京：电子工业出版社，2005.10
新编计算机类本科规划教材
ISBN 7-121-01825-X

Ⅰ．计…　Ⅱ．李…　Ⅲ．数值计算—计算方法—高等学校—教材　Ⅳ．O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第117091号

责任编辑：何　雄
印　　刷：北京牛山世兴印刷厂
出版发行：电子工业出版社
　　　　　北京市海淀区万寿路173信箱　邮编　100036
经　　销：各地新华书店
开　　本：787×1092　1/16　印张：18　字数：460.8千字
印　　次：2005年10月第1次印刷
印　　数：5 000册　定价：24.00元

凡购买电子工业出版社的图书，如有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系。联系电话：(010)68279077。质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

前　言

随着科学技术的飞速发展和计算机的广泛应用，现代科学已呈现出理论科学、实验科学和计算科学三足鼎立的局面。作为计算科学的重要手段和工具，计算方法已成为当代理工科大学生必备的基础和技能。从 20 世纪 80 年代起，“计算方法”就成为信息和计算机等专业本科生的专业基础课。作者从事“计算方法”教学十余载，在教学过程中发现，学生在学习“计算方法”课程时，存在三个明显的问题：一是在学这门课时，学生学过的数学知识大多已淡忘，翻开《高等数学》和《线性代数》课本，也不知从何看起；二是在实践环节中，学生用所学过的程序设计语言编写计算方法试验程序，感到非常吃力；三是许多学生对计算方法中的算法，只知其然不知其所以然。鉴于此，作者将自己一直使用的讲义进行整理，编写了这本教材，以尝试解决这些问题。

全书共分 9 章，第 1 章介绍计算方法研究的对象和特点，以及误差理论；第 2 章既简明又系统地介绍了计算方法的数学基础，主要包括微积分、微分方程和线性代数的有关概念和结论；第 3 章介绍非线性方程的数值解法，包括二分法、迭代法和牛顿法；第 4 章介绍解线性方程组的直接法，主要包括消去法、矩阵分解法和误差估计；第 5 章介绍解线性方程组的迭代法，主要包括 Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法、SOR 迭代法，以及迭代公式的收敛性；第 6 章介绍插值与曲线拟合，主要包括拉格朗日插值、牛顿插值、样条插值及基于最小二乘原理的多项式拟合；第 7 章介绍数值积分和数值微分，主要包括基于插值理论的牛顿-柯特斯求积公式、高斯求积公式、龙贝格求积公式及插值型求导公式；第 8 章介绍常微分方程初值问题的数值解法，主要包括欧拉方法及其变形、龙格-库塔方法及单步法的收敛性和稳定性；第 9 章介绍 MATLAB 编程基础及其在计算方法中的应用，主要介绍 MATLAB 编程环境、矩阵计算、图形功能，以及用 MATLAB 实现计算方法中的基本算法，并对这些算法配有 MATLAB 和 C 语言源代码。讲授全书内容，约需要 40～60 学时，另外，实验约需要 12～18 学时。

本书的特点是：

(1) 知识结构完整。既有计算方法所需的数学知识，又有现代数值计算软件 MATLAB 在计算方法中的应用，一书在手，无须其他资料。

(2) 注重实践和应用。书中提供约 20 个 MATLAB 和近 10 个 C 语言源代码，以实现本书介绍的主要算法，并对结果进行比较，测试数据全部选自本书的例题；附录中有精心设计的 9 个实验，供读者选用。

(3) 方便教学。全书每章都有内容提要、教学建议和本章小结，说明每章的重点、难点、选学内容和所需教学时数。书后的 9 个实验，可以加强计算方法课程的实践环节。本书还配有电子教案、模拟试题和各章习题详解，供教师使用。

(4) 便于自学。本书注重介绍算法的来龙去脉、基本思路和推导过程，每个算法都配有结构化流程图，并在第 9 章有示例源代码供读者参考。

特别值得一提的是，书中对比了 C 语言和 MATLAB 实现各算法的优劣，通过这种对比，读者有望深刻理解“计算方法”的精髓。

本书可作为大学本科计算机、电子信息和近电类专业的教材使用，也可供从事科学与工程计算的科技工作者和研究人员参考。

本书的出版得到了山西大学教材建设经费的资助;本书的编写得到了山西大学教务处、山西大学计算机与信息技术学院的大力支持,特别是梁吉业教授在百忙中审阅了本书的全稿,提出了许多宝贵的意见和建议;本书的出版也得到了电子工业出版社何雄编辑的帮助,他精心策划、积极申报,才使本书得以出版,在此一并表示感谢。

由于作者水平有限,书中难免有错误和疏漏之处,恳请读者指正。

于山西大学

目　　录

第1章　引论 …… 1

1.1　计算方法研究的对象与特点 …… 1

1.2　误差和有效数字 …… 4

1.2.1　误差的来源 …… 4

1.2.2　误差的度量 …… 5

1.3　误差的传播 …… 8

1.3.1　函数的误差 …… 8

1.3.2　算术运算的误差 …… 9

1.3.3　数值稳定性 …… 10

1.4　数值计算的若干原则 …… 11

本章小结 …… 15

习题1 …… 15

第2章　计算方法的数学基础 …… 17

2.1　微积分的有关概念和定理 …… 17

2.1.1　数列与函数的极限 …… 17

2.1.2　连续函数的性质 …… 19

2.1.3　罗尔定理和微分中值定理 …… 19

2.1.4　积分加权平均值定理 …… 20

2.1.5　二元泰勒定理 …… 21

2.2　微分方程的有关概念和定理 …… 22

2.2.1　基本概念 …… 22

2.2.2　初值问题解的存在惟一性 …… 23

2.2.3　初值问题的适定性 …… 24

2.3　线性代数的有关概念和定理 …… 25

2.3.1　线性相关和线性无关 …… 25

2.3.2　方阵及其初等变换 …… 26

2.3.3　方程组解的存在惟一性 …… 29

2.3.4　特殊矩阵 …… 30

2.3.5　方阵的逆及其运算性质 …… 31

2.3.6　矩阵的特征值及若干运算性质 …… 33

2.3.7　主子阵和主子式 …… 35

2.3.8　对称正定矩阵 …… 35

2.3.9　对角占优矩阵 …… 37

2.3.10　向量和连续函数的内积 …… 37

2.3.11　向量、矩阵和连续函数的范数 …… 38

本章小结 …… 44
习题 2 …… 44
第 3 章 方程求根 …… 46
3.1 引言 …… 46
3.1.1 根的存在性 …… 47
3.1.2 根的分布 …… 47
3.1.3 根的精确化 …… 48
3.2 二分法 …… 49
3.3 迭代法 …… 52
3.3.1 不动点迭代 …… 52
3.3.2 迭代法的收敛性 …… 53
3.3.3 迭代法的改善 …… 59
3.4 牛顿迭代法 …… 60
3.4.1 牛顿迭代公式及其几何意义 …… 60
3.4.2 牛顿迭代法的收敛性 …… 61
3.4.3 重根情形 …… 67
3.5 弦截法 …… 68
本章小结 …… 69
习题 3 …… 69
第 4 章 解线性方程组的直接法 …… 72
4.1 引言 …… 72
4.2 高斯(Gauss)消去法 …… 73
4.2.1 顺序高斯消去法 …… 73
4.2.2 主元素高斯消去法 …… 77
4.2.3 高斯-约当(Gauss-Jordan)消去法 …… 79
4.3 矩阵三角分解法 …… 81
4.3.1 高斯消去法与矩阵三角分解 …… 81
4.3.2 直接三角分解法 …… 83
4.4 特殊线性方程组的解法 …… 87
4.4.1 解三对角方程组的追赶法 …… 87
4.4.2 解对称正定方程组的平方根法 …… 89
4.5 误差分析 …… 93
4.5.1 病态方程组与条件数 …… 93
4.5.2 病态方程组的解法 …… 96
本章小结 …… 97
习题 4 …… 98
第 5 章 解线性方程组的迭代法 …… 100
5.1 引言 …… 100
5.1.1 向量序列与矩阵序列的极限 …… 100
5.1.2 迭代法的构造 …… 101

5.2 雅可比迭代法和高斯-塞德尔迭代法 …… 102
5.2.1 雅可比(Jacobi)迭代法 …… 102
5.2.2 高斯-塞德尔(Gauss-Seidel)迭代法 …… 104
5.2.3 迭代法的收敛性 …… 106
5.3 超松弛(SOR)迭代法 …… 112
5.3.1 超松弛(SOR)迭代法概述 …… 112
5.3.2 超松弛迭代法的收敛性 …… 113
本章小结 …… 114
习题 5 …… 114
第6章 插值与最小二乘法 …… 118
6.1 引言 …… 118
6.1.1 插值问题 …… 118
6.1.2 插值多项式的存在惟一性 …… 119
6.2 拉格朗日(Lagrange)插值 …… 120
6.2.1 线性插值与抛物插值 …… 120
6.2.2 拉格朗日插值多项式 …… 122
6.2.3 插值余项与误差估计 …… 124
6.3 牛顿(Newton)插值 …… 127
6.3.1 均差与牛顿插值公式 …… 127
6.3.2 差分与牛顿前后插值公式 …… 132
6.4 埃尔米特(Hermite)插值 …… 134
6.4.1 两点三次埃尔米特插值 …… 134
6.4.2 低阶含导数项的插值 …… 136
6.5 分段低次插值 …… 138
6.5.1 高次插值与龙格(Runge)现象 …… 138
6.5.2 分段线性插值 …… 139
6.5.3 分段三次埃尔米特(Hermite)插值 …… 141
6.6 样条函数插值 …… 143
6.6.1 三次样条插值函数 …… 143
6.6.2 三次样条插值函数的求法 …… 145
6.7 离散数据的曲线拟合 …… 148
6.7.1 曲线拟合问题 …… 148
6.7.2 最小二乘法原理与多项式拟合 …… 148
6.7.3 正交多项式拟合 …… 151
本章小结 …… 152
习题 6 …… 152
第7章 数值积分与数值微分 …… 157
7.1 引言 …… 157
7.1.1 数值求积的必要性 …… 157
7.1.2 数值积分的基本思想 …… 158

7.1.3 代数精度 …… 158
7.1.4 插值型求积公式 …… 160
7.2 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式 …… 161
7.2.1 牛顿-柯特斯求积公式的导出 …… 161
7.2.2 牛顿-柯特斯求积公式的误差估计 …… 164
7.3 复合求积公式 …… 166
7.3.1 复合梯形求积公式 …… 166
7.3.2 复合辛普生求积公式 …… 167
7.4 外推算法与龙贝格(Romberg)算法 …… 170
7.4.1 变步长的求积公式 …… 170
7.4.2 外推算法 …… 171
7.4.3 龙贝格求积公式 …… 172
7.5 高斯求积公式 …… 177
7.5.1 高斯点与高斯求积公式 …… 177
7.5.2 高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式 …… 178
7.5.3 高斯求积公式的稳定性和收敛性 …… 182
7.6 数值微分 …… 183
7.6.1 中点公式 …… 183
7.6.2 插值型微分公式 …… 185
本章小结 …… 186
习题 7 …… 186
第 8 章 常微分方程初值问题的数值解法 …… 190
8.1 引言 …… 190
8.2 欧拉公式 …… 192
8.2.1 欧拉公式及其几何意义 …… 192
8.2.2 欧拉公式的变形 …… 193
8.3 单步法的局部截断误差和方法的阶 …… 196
8.4 龙格-库塔(Runge-Kutta)方法 …… 199
8.4.1 龙格-库塔方法的基本思想 …… 199
8.4.2 二阶龙格-库塔方法的推导 …… 199
8.4.3 四阶经典龙格-库塔方法 …… 202
8.5 单步法的收敛性和稳定性 …… 204
8.5.1 单步法的收敛性 …… 204
8.5.2 单步法的稳定性 …… 207
8.6 线性多步法 …… 210
8.6.1 线性多步法的构造原理 …… 210
8.6.2 亚当姆斯(Adams)方法 …… 211
8.6.3 预测-校正技术 …… 213
本章小结 …… 215
习题 8 …… 215

第 9 章　MATLAB 编程基础及其在计算方法中的应用 …… 218
9.1　MATLAB 简介 …… 218
9.2　命令窗口和基本命令 …… 219
9.3　变量、常量和数据类型 …… 220
9.4　数值运算 …… 221
9.4.1　向量运算 …… 221
9.4.2　矩阵运算 …… 222
9.5　符号运算 …… 224
9.5.1　字符串运算 …… 224
9.5.2　符号表达式运算 …… 225
9.5.3　符号矩阵运算 …… 228
9.5.4　符号微积分运算 …… 229
9.5.5　方程求解 …… 231
9.6　图形可视化 …… 233
9.6.1　二维图形绘制 …… 233
9.6.2　三维图形绘制 …… 235
9.7　程序设计 …… 236
9.7.1　命令文件与函数文件 …… 236
9.7.2　控制语句 …… 236
9.7.3　调试方法 …… 238
9.8　MATLAB 在计算方法中的应用 …… 240
9.8.1　方程求根 …… 240
9.8.2　解线性方程组的直接法 …… 244
9.8.3　解线性方程组的迭代法 …… 249
9.8.4　插值与曲线拟合 …… 253
9.8.5　数值积分 …… 257
9.8.6　常微分方程的数值解法 …… 262
本章小结 …… 266
习题 9 …… 266
附录 A　计算方法实验 …… 268
实验一　方程求根 …… 268
实验二　解方程组的直接法 …… 269
实验三　解线性方程组的迭代法 …… 270
实验四　插值问题 …… 271
实验五　离散数据的曲线拟合 …… 272
实验六　数值积分 …… 273
实验七　数值微分 …… 274
实验八　求解常微分方程的初值问题 …… 275
实验九　求解特殊线性方程组 …… 276
参考文献 …… 278

第1章　引　　论

学习要点

(1) 计算方法研究的对象与特点。计算方法研究的对象是用计算机求解各种数学问题,它既具有纯数学的抽象性与严密性的特点,又具有应用的广泛性与实验的技术性特点。

(2) 误差理论:误差的来源、误差的度量、误差的传播。

(3) 数值计算的若干原则:避免两相近数相减和绝对值太小的除数、简化计算步骤、使用数值稳定的算法。

教学建议

本章是《计算方法》课程的开始,要求学生了解计算方法的特点和研究对象,重点学习误差的基本概念和性质,掌握绝对误差、相对误差和有效数字的关系,了解数值计算的基本原则。建议学时:2～4 学时。

1.1　计算方法研究的对象与特点

随着计算机的广泛应用和科学技术的高速发展,大量复杂的科学计算问题呈现在人们面前,要完成这些工作,仅靠人的自身努力是不可能的,必须借助于计算机这一伟大的科技发明,而使计算机有效解决科学计算问题的关键技术是数值计算方法。让我们首先从下面的几个例子谈起。

【例 1.1.1】 求解 n 阶线性方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$。

式中,$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$

解　根据克莱姆(Gramer)法则,若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异矩阵,即 $\det(\boldsymbol{A})\neq 0$,则方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$ 有惟一的解

$$x_1=\frac{\det(\boldsymbol{A}_1)}{\det(\boldsymbol{A})},\ x_2=\frac{\det(\boldsymbol{A}_2)}{\det(\boldsymbol{A})},\ \cdots,\ x_n=\frac{\det(\boldsymbol{A}_n)}{\det(\boldsymbol{A})} \tag{1.1.1}$$

式中

$$A_j = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j-1} & b_1 & a_{1j+1} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2j-1} & b_2 & a_{2j+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj-1} & b_n & a_{nj+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}, \quad (j = 1, 2, \cdots, n)$$

是用常向量 $\boldsymbol{b}$ 代换系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 j 列后所得的 n 阶方阵。

这就意味着解决此问题,需要计算 $\det(\boldsymbol{A}),\det(\boldsymbol{A}_1),\det(\boldsymbol{A}_2),\cdots,\det(\boldsymbol{A}_n)$,共 $n+1$ 个行列式,而每一个行列式展开后有 $n!$ 项,每一项有 n 个数,需要 $n-1$ 次乘法。如果忽略加、减、除法的次数,仅计算乘法的次数,就有 $(n+1)\times n!\times(n-1)$ 次。例如,当 $n=20$ 时,乘法次数为:$21\times 20!\times 19\approx 9.7\times 10^{20}$ 次。

若用每秒 12.5 万次乘除法的计算机计算,则需 $9.7\times 10^{20}/(1.25\times 10^5)\approx 7.8\times 10^{15}\,\mathrm{s}$,约为 24 000 万年。如果用每秒 1 亿次乘除法的银河Ⅰ型巨型计算机计算此问题,需 30 万年,用每秒 10 亿次乘除法的银河Ⅱ型巨型计算机计算此问题,需 3 万年。显然,仅仅只靠提高计算机的计算速度不是解决此问题的主要手段。实际上,利用本书介绍的高斯消去法,同样用每秒 12.5 万次乘除法的计算机求解 20 阶线性方程组,只需要大约 0.02s 的时间。

例 1.1.1 说明:某些数学问题在理论上有解决的方法,但在实际中并不实用,必须寻找新的、行之有效的计算方法。

【例 1.1.2】 设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 区间单调连续,且 $f(a)\cdot f(b)<0$,求方程 $f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 内的根。

解 由微积分的知识可知,方程 $f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 有惟一的实根,解此问题与函数 $f(x)$ 的形式有关。

若 $f(x)=ax^2+bx+c$,由一元二次方程的求根公式知,$f(x)=0$ 的根为

$$x_{1,2} = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

若 $f(x)=x^3-1$,由代数知识可知,$f(x)=0$ 的根为

$$x_1 = 1, \qquad x_2 = \frac{-1+\mathrm{i}\sqrt{3}}{2} = \omega, \qquad x_3 = \frac{-1-\mathrm{i}\sqrt{3}}{2} = \omega^2$$

若 $f(x)=x^3+px+q$,则 $f(x)=0$ 的根为

$$x_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2}+\sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2+\left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2}-\sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2+\left(\frac{p}{3}\right)^3}} = z_1 + z_2,$$

$$x_2 = z_1\omega + z_2\omega^2, \qquad x_3 = z_1\omega^2 + z_2\omega$$

若 $f(x)=ax^3+bx^2+cx+d$,可将 $f(x)=0$ 两边除以 a,并设 $x=y-\dfrac{b}{3a}$,则将原方程化为如下形式

$$y^3 + py + q = 0$$

由此解出 y_1,y_2,y_3,得 $x_i=y_i-\dfrac{b}{3a}$,$(i=1,2,3)$。

若 $f(x)$ 为四次多项式,可想而知,其求根公式会更加复杂,不过仍然可以求解。遗憾的是,若 $f(x)$ 为五次以上的多项式,由代数理论知,$f(x)=0$ 的根不能由系数的初等函数表示,即五次以上的代数方程无求根公式。

若 $f(x)$ 为非代数形式,如 $f(x)=x\cdot\cos x+\mathrm{e}^x\cdot\log_2 x$,则方程 $f(x)=0$ 是不能用解析方

法求得的。

例 1.1.2 说明：某些数学问题在理论上就没有解决的方法，解决此类问题必须用数值计算方法求其近似值。

【例 1.1.3】 求定积分 $I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx$，$(n = 0,1,2,\cdots,20)$。

解 因为

$$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5}dx + 5\int_0^1 \frac{x^{n-1}}{x+5}dx = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5}dx = \int_0^1 \frac{x^{n-1}(x+5)}{x+5}dx$$
$$= \int_0^1 x^{n-1}dx = \frac{1}{n}x^n\Big|_0^1 = \frac{1}{n}$$

由此可得递推公式
$$I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} \tag{1.1.2}$$

并且
$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}dx = \ln(x+5)\Big|_0^1 = \ln 6 - \ln 5 = \ln\frac{6}{5} \approx 0.182\,322$$

由微积分的知识可知，I_n 有如下性质：

① $I_n > 0$　　　　（因为被积函数 $f(x)$ 在 $(0,1)$ 上非负）

② I_n 单调递减　　（当 $n_1 > n_2$ 时，$I_{n_1} < I_{n_2}$）

③ $\lim\limits_{n\to\infty} I_n = 0$　　（因为 $\lim\limits_{n\to\infty}\frac{x^n}{x+5} = 0$，　$x \in [0,1]$）

④ $\frac{1}{6n} < I_{n-1} < \frac{1}{5n}$，$(n > 1)$

（因为由式(1.1.2)有 $I_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5}I_n < \frac{1}{5n}$，且 I_n 单调递减，则 $I_n = \frac{1}{n} - 5I_{n-1} > I_{n-1}$，故 $I_n < \frac{1}{6n}$）

现在用两种方法计算 I_n。

方法一：根据式(1.1.2)直接从 I_1 计算到 I_{20}，计算结果见表 1.1.1。

表 1.1.1　根据式 1.1.2 计算的结果

n	I_n	n	I_n	n	I_n	n	I_n
1	0.088 392 2	6	0.024 323 9	11	0.017 324 7	16	−10.156 9
2	0.058 038 9	7	0.021 237 8	12	−0.003 290 22	17	−50.843 3
3	0.043 138 7	8	0.018 810 9	13	−0.093 374 2	18	−254.161
4	0.034 306 3	9	0.017 056 6	14	−0.395 442	19	−1 270.86
5	0.028 468 6	10	0.014 716 9	15	−2.043 88	20	−6 354.23

方法二：由 I_n 的性质④知

$$I_{n-1} \approx \left(\frac{1}{5n} + \frac{1}{6n}\right)/2$$

则
$$I_{20} \approx \frac{\frac{1}{6\times21} + \frac{1}{5\times21}}{2} = 0.008\,730\,16$$

然后利用递推公式
$$I_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5}I_n \tag{1.1.3}$$

自 I_{19} 计算到 I_0，结果见表 1.1.2。

表 1.1.2　根据式(1.1.3)计算的结果

n	I_n	n	I_n	n	I_n	n	I_n
19	0.008 253 97	14	0.011 229 2	9	0.016 926 5	4	0.034 306 3
18	0.008 875 52	13	0.012 039 9	8	0.018 836 9	3	0.043 138 7
17	0.009 336 01	12	0.012 976 6	7	0.021 232 6	2	0.058 038 9
16	0.009 897 50	11	0.014 071 3	6	0.024 325 0	1	0.088 392 2
15	0.010 520 5	10	0.015 367 6	5	0.028 468 4	0	0.182 322

现在我们对这两种方法作一比较,方法一的初值 I_0 具有 6 位有效数字,比较精确,但由该方法产生的数值解自 I_{12} 开始出现负值,且其绝对值逐渐增加,这显然与 I_n 的性质相矛盾,因此由方法一计算的结果不符合原问题的要求。而方法二的初始值 I_{20} 取的是一个近似的平均值,误差比较大,但所得结果不但完全符合原问题的要求,而且最后 I_0 的值与方法一的初始值相同,具有较高的精度。其根本原因是方法一由式(1.1.2)计算,从 I_{n-1} 到 I_n 每向前推进一步,若 I_{n-1} 有误差的话,其计算值的舍入误差便增长 5 倍,误差的放大传播导致最终的结果与原问题的真值相悖,因此,是不稳定的。而方法二由式(1.1.3)从 I_n 到 I_{n-1} 计算,每向后推进一步,若 I_n 有误差的话,其舍入误差便减少为原来的 1/5,因此,获得了与原问题的性质一致的数值结果,因此是稳定的。

例 1.1.3 说明:某些数学问题即使在实践中有解决的方法,仍然需要进行误差分析。

从以上三个例子可以看出,许多数学问题的解决必须借助于计算机,而且要选择合理、有效的方法。计算方法就是专门研究各种数学问题的计算机解法(数值解法)的一门学科,包括方法的构造和求解过程的理论分析及软件实现,方法的收敛性、稳定性以及误差分析等。计算方法是计算数学的一个重要分支,既具有纯数学的抽象性与严密性的特点,又具有应用的广泛性与实验的技术性特点。因此,在学习计算方法时,要充分考虑计算机的特点,使所构造的算法,应只包括计算机能直接处理的算术运算和逻辑运算,并严格控制计算的复杂性,还要在相关数学理论的基础上对误差进行分析。

由于数学的学科十分广泛,所出现的数学问题也各不相同。本课程只涉及工程和科学实验中常见的数学问题,其中包括线性方程组、函数插值、离散数据的拟合、微积分、微分方程、非线性方程等,这些问题是其他数学问题的基础。

1.2　误差和有效数字

1.2.1　误差的来源

用数值方法求解数学问题,不可避免地会产生误差。实际上,在各种实际问题的求解过程中,误差的产生是绝对的,精确值却是相对的。产生误差的原因一般有以下几种:

(1) 模型误差

例如,求一个鸡蛋的表面积,首先要建一个数学模型,可以近似用球的表面积公式计算,但鸡蛋与球的形状差别较大,为了减小误差,可以用椭球的表面积公式计算。但鸡蛋的形状是一头大,一头小,仍然与椭球的形状不同,为了进一步减小误差,可以将鸡蛋的曲线画出来,利用曲面积分公式计算,但仍然会产生误差,这种数学模型的解与实际问题的解之间出现的误差,称为模型误差。

（2）测量误差

在建立数学模型以后，接下来就要进行一些数据的测量。例如，为了求鸡蛋的表面积，就要测量相关数据，若用球的表面积公式计算，则要测量其半径；若用椭球表面积计算，则要测量长半轴和短半轴；若要用曲面积分公式计算，则要测量积分区间等。由于测量手段的限制，在实际测量中，总会产生误差，这种在测量具体数据时产生的误差称为测量误差。

（3）截断误差（也称方法误差）

当用数学模型不能求出问题的精确解时，就要用数值方法求解，例如，用梯形法求定积分

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

则公式为

$$I \approx I_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \tag{1.2.1}$$

实际上，这是用过两点 $(a, f(a))$，$(b, f(b))$ 的直线 $l(x)$ 代替被积函数 $f(x)$ 得到的积分值，即

$$I_1 = \int_a^b l(x)\mathrm{d}x$$

在本书的后续章节中，我们会知道 I 与 I_1 之间的误差为

$$R_1 = I - I_1 = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \qquad \eta \in (a,b)$$

R_1 称为梯形求积公式的方法误差。这种数学模型的准确解与数值方法的准确解之间的误差，称为截断误差。因为截断误差是方法固有的，所以又称为方法误差。对某数学问题的数值解进行误差估计，主要是指方法误差，这是在本书中要讨论的重点。

（4）舍入误差

由于计算机字长的限制，某些数（如无理数）不能在计算机内精确表示，计算结果必然也会产生误差。例如，梯形求积公式（1.2.1）在用计算机求解 $f(a)$，$f(b)$ 时，一般只能得到它们的近似值 $\tilde{f}(a)$ 和 $\tilde{f}(b)$，加上式（1.2.1）本身计算的误差，最终只能得到 I_1 的近似值 I_2。

$$I_1 \approx I_2 = \frac{b-a}{2}[\tilde{f}(a)+\tilde{f}(b)]$$

I_1 与 I_2 之间的误差就是舍入误差。这种由于计算机字长的限制而产生的误差，称为舍入误差。

针对不同的数值方法，误差估计的侧重点也不同。例如，在线性方程组的数值求解中，主要讨论输入数据的误差和舍入误差的传播，而在数值积分和微分中，重点分析各种方法的截断误差。

1.2.2 误差的度量

对于同一个数学问题，采用不同的方法会得出不同的结果。衡量某一方法优劣的标准之一，是看其结果的误差是否较小。一般度量误差的标准有三种形式：

（1）绝对误差与绝对误差限（界）

定义 1.2.1 （绝对误差）设 x 为某量的精确值，x^* 是它的一个近似值，则称 $E(x^*) = x - x^*$ 为近似值 x^* 的绝对误差，简称误差。由于精确值 x 是未知的，因此 x^* 的绝对误差 $E(x^*)$ 一般也是求不出来的。但是，如果能求出 x^* 误差的一个范围

$$E(x^*) = |x - x^*| \leqslant \delta(x^*)$$

则称 $\delta(x^*)$ 为近似值 x^* 的绝对误差限，简称误差限。

例如：设 $x=\pi=3.141\,592\,653\,5\cdots$，若取 x 的一个近似值 $x^*=3.141\,59$，则

$$\delta(x^*)=|x-x^*|\leqslant 0.5\times10^{-5}$$

则称 x^* 的误差限为 0.5×10^{-5}。

一个近似数的误差限不惟一，通常取满足 $|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{n}$ 的最小值。

(2) 相对误差与相对误差限(界)

绝对误差有时不能完全刻画一个近似数的精确程度，例如，测量一个书桌和一个体育场的面积，误差都是 $1\mathrm{cm}^2$，显然，后者的测量更精确，因此，决定某量的近似值的精度，除了考虑绝对误差的大小外，还要考虑该量自身的大小，为此引入相对误差的概念。

定义 1.2.2 （相对误差）设 x 为某量的精确值，x^* 是它的一个近似值，则称 $E_r(x^*)=\frac{x-x^*}{x}$，$(x\neq0)$ 为 x^* 的相对误差。

由于精确值 x 是未知的，因此，在实际计算中常取 $E_r(x^*)=\frac{x-x^*}{x^*}$ 作为 x^* 的相对误差。若 $E_r(x^*)$ 的绝对值小于某一个已知正数 $\delta_r(x^*)$，即 $|E_r(x^*)|=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant\delta_r(x^*)$，则称 $\delta_r(x^*)$ 为近似值 x^* 的相对误差限(界)。

例如：设 $x=\pi=3.141\,592\,653\,58\cdots$，取 x 一个近似值 $x^*=3.141\,59$，则

$$\delta_r(x^*)=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant 0.8\times10^{-6}$$

则称 x^* 的相对误差限为 0.8×10^{-6}。

(3) 有效数字

当某量的精确值的位数较多时，我们通常采用“四舍五入”的方法，取 x 的前面若干位作为 x 的近似值。

例如：$x=3.141\,592\,653\,58\cdots$

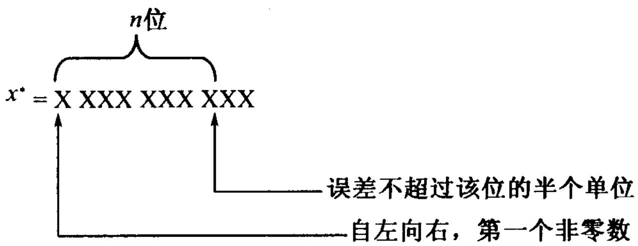
取 1 位　$x_1=3$　$\delta(x_1)\approx0.14\leqslant0.5$

取 5 位　$x_5=3.141\,6$　$\delta(x_5)\approx0.000\,007<0.000\,05$

取 10 位　$x_{10}=3.141\,592\,654$　$\delta(x_{10})\approx0.000\,000\,000\,42<0.000\,000\,000\,5$

这些近似值的误差限都不超过该近似值的最后一位数的半个单位，则称它们都是有效数字，由此得有效数字的定义。

定义 1.2.3 （有效数字 1）如果近似值 x^* 的误差限不超过某一位的半个单位，若该位数字到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位，那么这 n 位数字称为 x^* 的有效数字，并称 x^* 有 n 位有效数字，即



在计算机中，参加运算的数往往要进行规格化表示，因此，有效数字也可以定义如下：

定义 1.2.4 （有效数字 2）设 x^* 是 x 的一个近似值，写成规格化形式

$$x^* = \pm 10^k \times 0.a_1a_2\cdots a_n\cdots \tag{1.2.2}$$

式中，$a_i(i=1,2,\cdots)$是 0～9 之间的整数，且 $a_1\neq 0$，k 为整数。如果

$$|x-x^*| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{k-n} \tag{1.2.3}$$

则称 x^* 为 x 的具有 n 位有效数字的近似值。

【例 1.2.1】 设$x=\sqrt{200}=14.142\cdots$，　$x^*=14.1$

$y=\lg 2=0.301\,02\cdots$，　$y^*=0.301\,0$

$z=e^{-5}=0.006\,737\,9\cdots$，$z^*=0.006\,73$

求各近似值的有效数字。

解 方法一：

由于$\delta(x^*)=|x-x^*|=0.042\leqslant 0.05$，小于十分位的半个单位，因此，14.1 每位都是有效数字，故 x^* 有 3 位有效数字。

由于$\delta(y^*)=|y-y^*|=0.000\,02<0.000\,05$，小于万分位的半个单位，因此，0.301 0 中小数点后均为有效数字，故 y^* 有 4 位有效数字。

由于$\delta(z^*)=|z-z^*|=0.000\,007\,9<0.000\,05$，小于万分位的半个单位，因此，0.006 73 中的 6，7 为有效数字，而 3 不是有效数字，故 z^* 有 2 位有效数字。

方法二：

因为 $$x^*=0.141\times 10^2, k=2$$

而 $$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-1}, k-n=-1$$

所以 $n=3$，故 x^* 有 3 位有效数字。

因为 $$y^*=0.301\,0\times 10^0, k=0$$

而 $$|y-y^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4}, k-n=-4$$

所以 $n=4$，故 y^* 有 4 位有效数字。

因为 $$z^*=0.6>3\times 10^{-2}, k=-2$$

而 $$|z-z^*|\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-4}, k-n=-4$$

所以 $n=2$，故 z^* 有 2 位有效数字。

从上面的例子可以看出，有效数字的个数与小数点的位置及小数点后的位数无关。不过，从式(1.2.3)知，在 k 相同的情况下，n 越大，则 $k-n$ 越小，所以，有效数字越多，绝对误差就越小。

绝对误差限、相对误差限和有效数字都是用来度量近似数的误差的，它们之间必然存在着一定的联系。实际上，由相对误差的定义 $E_r(x^*)=\dfrac{E(x^*)}{x^*}$知，相对误差限与绝对误差限的关系是：$\delta_r(x^*)=\delta(x^*)/x^*$；由有效数字的定义知，有效数字与绝对误差的关系是：若近似值 $x^*=\pm 10^k\times 0.a_1a_2\cdots a_n\cdots$的绝对误差限为 $\delta(x^*)=|x-x^*|\leqslant\dfrac{1}{2}\times 10^{k-n}$，则 x^* 具有 n 位有效数字，而有效数字与相对误差的关系可由以下定理得到。

定理 1.2.1 （有效数字）设 x 的近似值可写成式(1.2.2)的规格化形式，